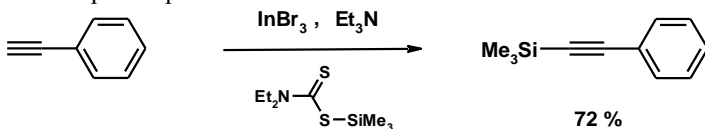
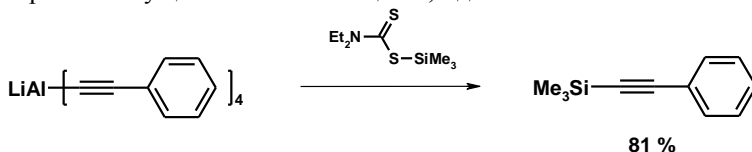


мольных количеств трибромида индия и триэтиламина при нагревании при кипении растворителя в течение 6 часов:



Использование хлорида цинка, бромида кадмия, а также трибромида индия без эквимольного количества триэтиламина гораздо менее эффективно.

Взаимодействие тетрафенилэтинилаланата лития с дитиокарбама-том кремния осуществляли в кипящем 1,4-диоксане:



Максимальный выход продукта силилирования достигается при проведении реакции в течение 6 часов, дальнейшее нагревание не приводит к увеличению выхода.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ НИТРОФУРОКСАНОВ

Федотова Е.И., Белик А.В.

Челябинский государственный университет
454001, г. Челябинск, ул. Бр. Кашириных, д. 129

Фуроксановый цикл занимает особое место среди различных азолов, поскольку он содержит два атома активного кислорода, которые не связаны с атомами углерода и водорода, а включены в «скрытую» нитрогруппу. Нитрофуроксаны интересны в качестве потенциальных компонентов энергоемких составов. В данной работе проведены квантово-химические расчеты в рамках теории функционала плотности методом B3LYP с использованием базисного набора 6-31G (d,p) молекул 3-нитрофуроксана (а) и 4-нитрофуроксана (б). Изучено электронное строение этих соединений, а также было вычислено силовое поле в декартовой системе координат, которое затем было переведено в координаты X_{8° , представляющие собой компоненты изменений векторов связей в своих для каждой связи декартовых системах координат. Этот подход был разработан Маянцем Л.С и Шалтупером Г.Б. [1].

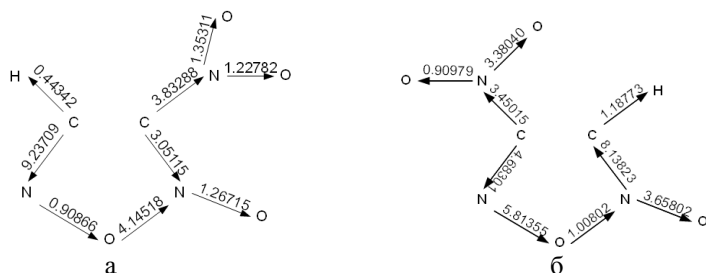


Рис. 1. Значения силовых коэффициентов в координатах X_{δ}° для молекул нитрофуруксанов (mdyn/Å)

Нами был определен суммарный заряд на реакционных центрах [2]. Анализ полученных данных показывает, что суммарный отрицательный заряд на атоме азота в «скрытой» нитрогруппе понижается с -0.3309 до -0.2986 при переходе $-\text{NO}_2$ группы из положения 3 в положение 4. Также было отмечено возрастание силовых постоянных связи $\text{C}_3\text{-N}_2$ и самой N-оксидной связи.

1. Mayants L.S., Shaltuper G.B. *Journal of Molecular Structure*. 1975. Vol.24. P. 409-431.

2. Т.В. Рыбин, А.В. Белик. *Вестник Челябинского государственного университета*. 2010. №24 (205). Физика. Вып. 8. с. 55-58

СПИРО-БИС-ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИЯ МЕТИЛ 1-АРИЛ-4,5-ДИГИДРО-4,5-ДИОКСО-3-ЦИННАМОИЛ-1Н-ПИРРОЛ-2-КАРБОКСИЛАТОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ АЦИКЛИЧЕСКИХ ЕНАМИНОЭФИРОВ

Филимонов В.О.⁽¹⁾, Силайчев П.С.⁽²⁾, Масливец А.Н.^(1,2)

⁽¹⁾Пермский государственный университет

614990, г. Пермь, ул. Букирева, д. 15

⁽²⁾Естественнонаучный институт ПГУ

614990, г. Пермь, ул. Генкеля, д. 4

E-mail: koh2@psu.ru

В продолжение исследований спиро-бис-гетероциклизаций моноциклических 1Н-пиррол-2,3-дионов под действием енаминов [1,2] изучено взаимодействие метил 1-арил-4,5-дигидро-4,5-диоксо-3-циннамоил-1Н-пиррол-2-карбоксилатов (Ia-в) с ациклическими енаминоэфиром — этил 3-(бензиламино)-3-фенилакрилатом (IIa) и этил 3-(бензиламино)бут-2-еноатом (IIб).